

VU Research Portal

Approximations and exact properties of density functionals from the strong-interaction limit of DFT

Giarrusso, S.

2020

document version

Publisher's PDF, also known as Version of record

[Link to publication in VU Research Portal](#)

citation for published version (APA)

Giarrusso, S. (2020). *Approximations and exact properties of density functionals from the strong-interaction limit of DFT*. [PhD-Thesis - Research and graduation internal, Vrije Universiteit Amsterdam].

General rights

Copyright and moral rights for the publications made accessible in the public portal are retained by the authors and/or other copyright owners and it is a condition of accessing publications that users recognise and abide by the legal requirements associated with these rights.

- Users may download and print one copy of any publication from the public portal for the purpose of private study or research.
- You may not further distribute the material or use it for any profit-making activity or commercial gain
- You may freely distribute the URL identifying the publication in the public portal ?

Take down policy

If you believe that this document breaches copyright please contact us providing details, and we will remove access to the work immediately and investigate your claim.

E-mail address:

vuresearchportal.ub@vu.nl

Abstract

Het werk dat in deze thesis wordt gepresenteerd bestrijkt een breed gebied binnen de dichtheidsfunctionaaltheorie (DFT), waaronder zowel benaderingen als exacte eigenschappen van dichtheidsfunctionalen.

Het benadrukt de brede mogelijkheden van model dichtheidsfunctionalen, die gebaseerd zijn op interpolaties langs de adiabatische connectie en die ingrediënten uit de limiet van de sterke interactie bevatten, bij toekomstige toepassingen op uitdagende chemische verbindingen, zoals verbindingen die edelmetaal-clusters of -complexen bevatten.

Verder wordt er een nieuwe aanpak voor een efficiënte resummation van de perturbatieve reeksontwikkeling rond de Hartree-Fock (HF) referentietoestand voorgesteld die veel aantrekkelijke theoretische eigenschappen heeft.

Parallel worden verscheidene exacte eigenschappen die nuttig zijn voor de ontwikkeling van dichtheidsfunctionalen, waaronder een somregel, een vergelijking van de twee meest gebruikte gauges in de definitie van de exchange-correlation energiedichtheid, en een onverwachte kwalitatieve eigenschap van de exacte Kohn-Sham (KS) potentiaal in het geval van een uitgerekte heteronucleaire binding, voor het eerst gerapporteerd.

In het geheel laat dit werk zien dat een aantal onderscheidende eigenschappen van de limiet van de sterke interactie van DFT (en mogelijk ook HF-theorie) gebruikt kunnen worden als richtlijnen voor het ontwikkelen van dichtheidsfunctionaal modellen die ook precies zijn voor problematische gevallen, zoals sterk gecorreleerde systemen en dissociatieprocessen.